



University of Groningen

## Spin and charge densities in some iron compounds. A study of the electronic structure in Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, FeTiO<sub>3</sub>, LaFeO<sub>3</sub> and CuFeS<sub>2</sub>

Boekema, Carolus

**IMPORTANT NOTE:** You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

*Document Version*

Publisher's PDF, also known as Version of record

*Publication date:*

1977

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

*Citation for published version (APA):*

Boekema, C. (1977). Spin and charge densities in some iron compounds. A study of the electronic structure in Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, FeTiO<sub>3</sub>, LaFeO<sub>3</sub> and CuFeS<sub>2</sub>. Groningen: s.n.

### Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

### Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

In dit proefschrift wordt een onderzoek beschreven aan de volgende ijzerverbindingen:

Magnetiet ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), Ilmeniet ( $\text{FeTiO}_3$ ), Lanthaan-orthoferriet ( $\text{LaFeO}_3$ ) en Chalcopyriet ( $\text{CuFeS}_2$ ). In het inleidende hoofdstuk wordt uiteengezet dat in ijzerverbindingen het karakter van de buitenste 3d electronen kan variëren van gelocaliseerd tot itinerant. Verder dient men voor een goede beschrijving van de elektronische structuur ook electron correlatie-effecten en electron-fonon wisselwerkingen in beschouwing te nemen. Zoals beschreven in het tweede hoofdstuk werd bij het onderzoek voornamelijk gebruik gemaakt van Mössbauer effect spectroscopie, waarmee belangrijke informatie omtrent het ijzer en zijn omgeving wordt verkregen. De metingen zijn gedaan als functie van temperatuur en druk. Verder zijn er weerstandsmetingen gedaan en werd fotoelectronspectroscopie ook toegepast.

In hoofdstuk 3 wordt het onderzoek van magnetiet beschreven. De resultaten kunnen als volgt worden samengevat: het Mössbauer onderzoek aan licht gedoopt magnetiet boven de Verwey overgangstemperatuur ( $T_V = 120 \text{ K}$ ) toont ladingsdichtheidsoscillaties in het B deelrooster aan. Het korte afstandsaspect van de ladingsoscillaties kan goed beschreven worden met een theoretisch model waarin de d electronen als gelocaliseerd beschouwd worden.

Het nogal merkwaaardige gedrag van de Mössbauer parameters in Sn gedoopt magnetiet t.o.v. zuiver magnetiet in een temperatuurgebied rondom  $T_V$  duidt op een Verwey overgangsgebied met twee of meerdere overgangen i.p.v. een enkele Verwey overgang.

In de hoofdstukken 4, 5 en 6 wordt het onderzoek aan respectievelijk ilmeniet, lanthaan-orthoferriet en chalcopyriet beschreven.

$\text{FeTiO}_3$  en  $\text{CuFeS}_2$  zijn magnetische halfgeleiders waarvan verwacht mocht worden dat zij bij hoge druk geleidingsanomalieën gingen vertonen. Deze effecten hebben we niet waargenomen. De geleiding neemt bij ilmeniet wel sterk toe bij toenemende druk. Naar onze mening vindt deze geleiding hoofdzakelijk plaats in de ijzerlagen van ilmeniet.

Voor chalcopyriet, dat geen anomaal effect vertoont, is vast komen te staan dat het ijzerion driewaardig is en dat het zich waarschijnlijk

in een "hoge spin" toestand bevindt.

Om meer informatie te krijgen omtrent de invloed van covalentie op de hyperfijnwisselwerkingen is er Mössbauer onderzoek verricht aan gedoopt  $\text{LaFe}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ . De waargenomen verschijnselen bij 4.2 K kunnen goed beschreven worden met "supertransfer", gebaseerd op een LCAO model.

2288  
1